

Prof. Dr. Sabine H. L. Klapp
 Dr. Alice von der Heydt
 Inst. f. Theoret. Physik, TU Berlin

Blatt 7

Abgabe: Do., 11.06.2015, 10:15 Uhr,
 in/vor der Vorlesung
 Bitte Lösungen großzügig kommentieren und mit Namen versehen!

Aufgabe 18. Fokker-Planck-Gleichung für eine dynamische Variable (10 Punkte)

In der Vorlesung wurde aus der Kramers-Moyal-Entwicklung (für $K_{i_1 \dots i_n}^{(n)} = 0$ für $n \geq 3$) die Fokker-Planck-Gleichung für eine dynamische Variable $x(t)$ hergeleitet,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \hat{L}_{\text{FP}} P(x, t),$$

mit dem Fokker-Planck-Operator

$$\hat{L}_{\text{FP}} = -\frac{\partial}{\partial x} K_x^{(1)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_{xx}^{(2)}(x, t)$$

a) Geben sie für die eindimensionale Langevin-Gleichung

$$\dot{v}(t) = -\gamma v(t) + f(t),$$

mit Reibungskoeffizient γ und gaußverteiletem weißem Rauschen, charakterisiert durch $\langle f(t) \rangle = 0$ und $\langle f(t_1) f(t_2) \rangle = \Gamma \delta(t_1 - t_2)$, den Fokker-Planck-Operator an, und bestimmen Sie die Lösung $P(v, t)$ der Fokker-Planck-Gleichung: Durch zweifache Fouriertransformation $[(\psi, \omega)$ konjugiert zu $(v, t)]$ erhalten Sie

$$\frac{\partial \ln \hat{P}(\psi, \omega)}{\partial \psi} = \frac{i\omega}{\gamma\psi} - \frac{\Gamma\psi}{2\gamma},$$

und die bei der Integration über ψ auftretende Integrations-“Konstante” $\ln \hat{C}(\omega)$ bzw. (Fourier-Rücktransformation) $C(t = s)$ mit $s := -\gamma^{-1} \ln \psi$ (o.B.d.A. $\psi > 0$) bestimmen Sie durch die Anfangsverteilung $P(v, t = 0) = \delta(v - v_0)$ oder $\tilde{P}(\psi, t = 0) = e^{i\psi v_0}$. Bevor Sie bezüglich ψ rücktransformieren, substituieren Sie wieder $e^{-\gamma s} = \psi$. Im Limes $t \rightarrow \infty$ bzw. als stationäre Lösung sollte sich die Maxwell-Boltzmann-Verteilung ergeben (vgl. Vorlesung).

b) Betrachten Sie die *überdämpfte* Langevin-Gleichung für einen eindimensionalen Brownschen harmonischen Oszillator

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= v(t) \\ 0 &= -\gamma v(t) - \omega_0^2 x(t) + f(t) \end{aligned}$$

Geben Sie den Fokker-Planck-Operator an, und bestimmen Sie die *stationäre* Lösung der Fokker-Planck-Gleichung.

Aufgabe 19. Smoluchowski-Gleichung: Sedimentation von Brownschen Teilchen (10 Punkte)

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\underline{r}, t)$ für die Position $\underline{r} := (x, y, z)$ zur Zeit t eines Brownschen (z. B. Kolloid-) Teilchens mit Masse m im Schwerfeld (Gravitationsbeschleunigung g in z -Richtung) gilt die Smoluchowski-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) = D \nabla^2 P(\underline{r}, t) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix} \cdot \nabla P(\underline{r}, t)$$

mit der Diffusionskonstanten D und $c := Dmg/(k_B T)$ (bei Temperatur T). Die Anfangsposition des Teilchens sei $(0, 0, z_0 > 0)$.

- a) Verwenden Sie einen Separationsansatz $P(\underline{r}, t) = u(x, t)v(y, t)w(z, t)$, um zu zeigen, dass $P(\underline{r}, t) = u(x, t)u(y, t)w(z, t)$, mit

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{4Dt} \right\},$$

und für $w(z, t)$ die folgende partielle Differentialgleichung (PDGL) gilt:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial z^2} - c \frac{\partial}{\partial z} \right) w(z, t) = 0$$

Da der Einfluss der Gravitation so von der Diffusion in x - und in y -Richtung entkoppelt, können wir uns im Folgenden auf die Bewegung in z -Richtung konzentrieren.

- b) Die xy -Ebene bei $z = 0$ sei für das Brownsche Teilchen undurchlässig, also eine Begrenzungsebene für die Bewegung. Begründen Sie für diese Anordnung und die o.g. Startposition die folgenden Anfangs- bzw. Randbedingungen:

$$w(z, t = 0) = \delta(z - z_0), \quad \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{mg}{k_B T} \right) w(z, t) \Big|_{z=0} = 0 \quad \forall t > 0.$$

Betrachten Sie den Ansatz

$$w(z, t) = \eta(z, t) \exp \left\{ -\frac{c(z - z_0)}{2D} - \frac{c^2 t}{4D} \right\},$$

um eine einfachere PDGL für $\eta(z, t)$ zu erhalten. Wie lauten die entsprechenden Randbedingungen für $\eta(z, t)$?

- c) Trotz der Randbedingungen lässt sich mit einer Methode analog zur Bildladungs- methode in der Elektrostatik die Diffusionsgleichung für $\eta(z, t)$ folgendermaßen lösen:

$$\eta(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[\exp \left\{ -\frac{(z - z_0)^2}{4Dt} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(z + z_0)^2}{4Dt} \right\} \right] + \frac{mg}{k_B T \sqrt{4\pi Dt}} \int_{z_0}^{\infty} dz' \exp \left\{ -\frac{(z' + z)^2}{4Dt} + \frac{c(z' - z_0)}{2D} \right\}$$

Verifizieren Sie, dass die angegebene Lösung die Randbedingungen erfüllt, und geben Sie die Lösung $w(z, t)$ des ursprünglichen Problems an (Skizze für verschiedene Zeiten hilfreich). Im Limes $t \rightarrow \infty$ erhalten Sie die bekannte Dichteverteilung im Gleichgewicht; welches ist demnach die mittlere Höhe des Teilchens im Gleichgewicht?